

Svenskt NMR-centrum vid Göteborgs universitet

Verksamhetsrapport 2022

DATUM: 2023-02-07



Göran Karlsson
Föreståndare



Sammanfattning

Under 2022 har Svenskt NMR-centrum gett stöd till 118 externa projekt och 59 forskare (PIs) från Göteborgs universitet samt andra nationella och internationella universitet, från regioner, industri eller annan icke-akademisk organisation. Användning av NMR-utrustningen har varit ca 31 000 timmar. Knappt hälften av tiden har använts för strukturbologi, metabolomik står för ca 20% och övrig tid fördelas huvudsakligen på små molekyler materialvetenskap och DNP-NMR.

Uppgradering av ett 600 MHz-system har genomförts, liksom uppgradering av heliumförvätskare och ökning av kapaciteten i försörjningssystemet för flytande kväve. Ett system som möjliggör kontinuerlig analys av levande celler i NMR-rör införskaffades. Den defekta 900 MHz-magneten placerades som en konstinstallation framför Hasselbladlaboratoriet.

Svenskt NMR-centrum har koordinerat det VR-stödda SwedNMR-projektet och ISB-plattformen vid SciLifeLab. Svenskt NMR-centrum har också deltagit i de VR-stödda forskningsinfrastrukturprojekten NBIS, CBCS och PPS samt, på EU-nivå, PANACEA och R-NMR. Ytterligare två 1:e forskningsingenjörer rekryterades till verksamheten.

Svenskt NMR-centrum har använts i grundutbildning på avancerad nivå och arrangerat kurser/workshops för doktorander och postdocs. Verksamheten har genomfört flera outreach-aktiviteter och bl a arrangerat Svenskt NMR-möte i Göteborg.

De vetenskapliga resultaten presenteras i 27 artiklar i internationella tidskrifter. Kostnad för elektricitet, flytande kväve och flytande helium ökade kraftigt. Omsättningen var 19,3 Mkr och resultatet blev -177 kkr.

Summary

During 2022, the Swedish NMR Center has provided support to 118 external projects and 59 researchers (PIs) from the University of Gothenburg as well as other national and international universities, from regions, industry or other non-academic organizations. Use of the NMR equipment has been approximately 31,000 hours. Almost half of the time has been used for structural biology, metabolomics accounts for about 20% and the rest of the time is mainly spent on small molecules materials science and DNP-NMR.

Upgrade of a 600 MHz system has been completed, as well as upgrade of the helium liquefier and increase in capacity of the liquid nitrogen supply system. A system enabling continuous analysis of living cells in NMR tubes was acquired. The defective 900 MHz magnet placed as an art installation in front of the Hasselblad laboratory.

The Swedish NMR Center has coordinated the VR-supported SwedNMR project and the ISB platform at SciLifeLab. The Swedish NMR Center has also participated in the VR-supported research infrastructure projects NBIS, CBCS and PPS as well as, at EU level, PANACEA and R-NMR. Two further 1st research engineers were recruited to the business.

The Swedish NMR center has been used in basic education at advanced level and arranged courses/workshops for doctoral students and postdocs. The business has carried out several outreach activities *e.g.* arranged the Swedish NMR meeting in Gothenburg.

The scientific results are presented in 27 articles in international journals. The cost of electricity, liquid nitrogen and liquid helium increased sharply. The turnover was 19.3 Mkr and the result was SEK -177 kkr.

Innehållsförteckning:

Sammanfattning	3
Summary	3
Innehållsförteckning	5
NMR-magnetens användning	6
Övrig utrustning och installationer	7
Användning per applikationsområde	8
Personella resurser och infrastrukturer	9
Publikationer	9
Outreach och övriga aktiviteter	9
Användarenkät	10
Finansiering av forskningsinfrastrukturen	10
Ekonomi - resultat för 2022	10
Bilagor	
1. Publikationslista för 2022	12
2. Användarenkät	15

NMR-magneters användning

Den totala användningen under 2022 är drygt 31 000 timmar* Det är en minskning med ca 15% jämfört med föregående år. Spektrometeranvändning i timmar under perioden mars-december redovisas i figur1. Under året har planerlig service genomförts på gyrotronen i DNP-systemet och på samtliga kryoplattformar. I augusti 2022 genomförde Akademiska Hus ett oplanerat test av kylsystemet vilket initierade ett snabbstopp av ett flertal kryoplattformar och en quench på gyrotronen. Gyrotronen förlorade vacuum, återuppstarten var komplicerad och systemet var tillbaka i normal drift efter en månad.

900 MHz-magnet (blue)

Magneten har under året genomgående använts tillsammans med en unik 3mm HCN-kryoprob. Magneten är pumpad och magnetspolen är kyld till 2.18 K. Driften har under året varit mycket stabil. Beläggning har varit 77%, i nivå med föregående år, och främst inom användningsområdet strukturbiologi.

800#1 (indigo)

Magneten är utrustad med en 3mm HCN kryoprob och kyld provväxlare med hög kapacitet (Bruker SampleJet, 5x96 prov). Systemet har fungerat väl under 2022. Heliumavkok och kväveavkok är mycket stabilt. Magneten har under året använts i lägre omfattning än tidigare, beläggningen har varit 70%. Även här står strukturbiologi för den största användningen.

800#2 (red)

Magneten är utrustad med en 4-kanals CNH²H kryoprob och automatisk provväxlare med hög kapacitet. Användningen, 63 %, är något lägre än tidigare år. Strukturbiologi och småmolekyler / materialvetenskap har stått i fokus för användningen.

700 MHz (green)

Magneten är utrustad med en 4-kanalig HFCN-kryoprob och automatisk högkapacitetsprovväxlare. Den har fungerat väl under året, med en total användning på 57%.

600MHz - diff, MR, IVDr (white)

Magneten är utrustad med en kyld högkapacitetsprovväxlare och särskild H(X)-prov för metabolomik. Systemet är även utrustat med 3D gradientförstärkare och används även för diffusionsmätningar och microimaging. Växling mellan applikationer kräver byte av prob och operativsystem och planeras noggrant. Användningen har varit ca 70% vilket är en avsevärd ökning jämfört med tidigare år.

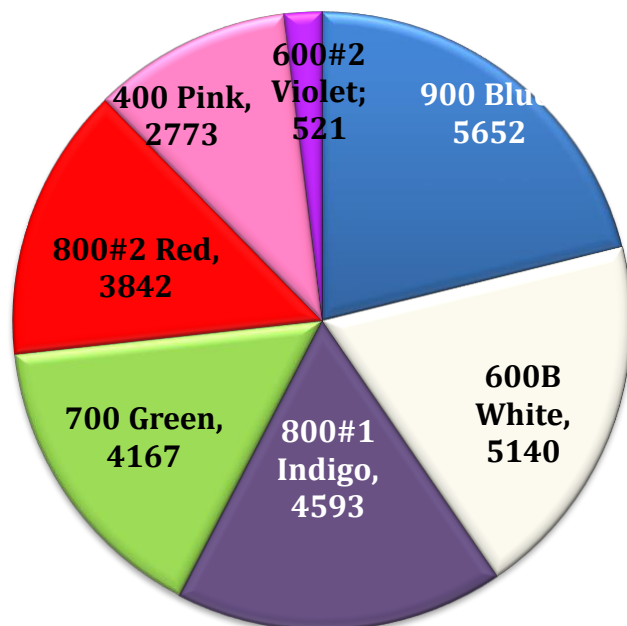
600 MHz för walk-up (violet)

Upphandling och inköp av elektroniskt styrsystem (NEO-konsol), kryoprob och kyld högkapacitetsprovväxlare slutfördes under 2022. Efter grundläggande installation har magneten förberetts för att fungera som walk-up instrument med web-baserad access och har helt nyligen tagits i bruk, med en total användning av ca 500 timmar under november och december.

400 MHz DNP-NMR (pink)

DNP-NMR är ett samarbetsprojekt med AstraZeneca. AstraZeneca står för instrumentkostnad och Svenskt NMR-centrum står för driftskostnader och vetenskaplig och teknisk expertis. Systemet består av två magneter, en NMR-magnet och en gyrotron. Gyrotronen används för att generera en förändring av polarisationstillståndet

på väteatomer, vilket leder till en kraftigt ökad känslighet. Trots att provbyte sker manuellt ligger användningen på 38% av helåret.



Figur. 1. Spektrometeranvändning i timmar under perioden mars-december 2022.

Övrig ny utrustning och installationer

Uppgradering av konsol, prob och provväxlare för en 600 MHz magnet har redan nämnts. Som en del av uppgraderingen inköptes också ett system, Insight NMR, som medger studier av reaktionsförlopp och levande celler under lång tid. Installation av Insight NMR påbörjade i december 2022.



Figur 2. Ny heliumförvätskare.

Upphandling och inköp av en ny heliumförvätskare genomfördes under 2022. Den nya förvätskaren är utrustad med två kallhuvuden (Figur 2). Den har fördubblad kapacitet, nominellt 40 L flytande helium per dygn, vilket väl svarar mot det totala behovet av flytande helium. Leverans var planerad till maj, men försenades till december 2022. Installation sker i januari 2023.

Den befintliga kvävetanken med en kapacitet på ca 6 000 L visade sig vara otillräcklig för att hantera full drift av utrustningen för DNP-NMR. Under våren uppfördes ett betongfundament utanför Hasselbladslaboratoriet och ett nytt tankavtal förhandlades med

leverantören AGA/Linde. Två nya 11 m³ kvävetankar installerades, med arbetstryck på 9 bar för gas resp 3 bar för flytande kväve (Figur 3). Differentiering av arbetstryck medför en reduktion i förluster i samband med uttag av flytande kväve.

Den skadade 900 MHz-magneten placerades som ett landmärke på ett betongfundament framför Hasselbladslaboratoriet (Figur 4). Om installationen kan anses utgöra ett konstverk får betraktaren avgöra. Installationen har dock medfört avsevärt ökat synliggörande av Svenskt NMR-centrum och dess verksamhet på Medicinareberget, både lokalt med även internationellt.



Figur 4. Två konstintresserade besökare. Krister Holmberg, Chalmers, (tv) och Brad Chmelka, UCSB, (th).



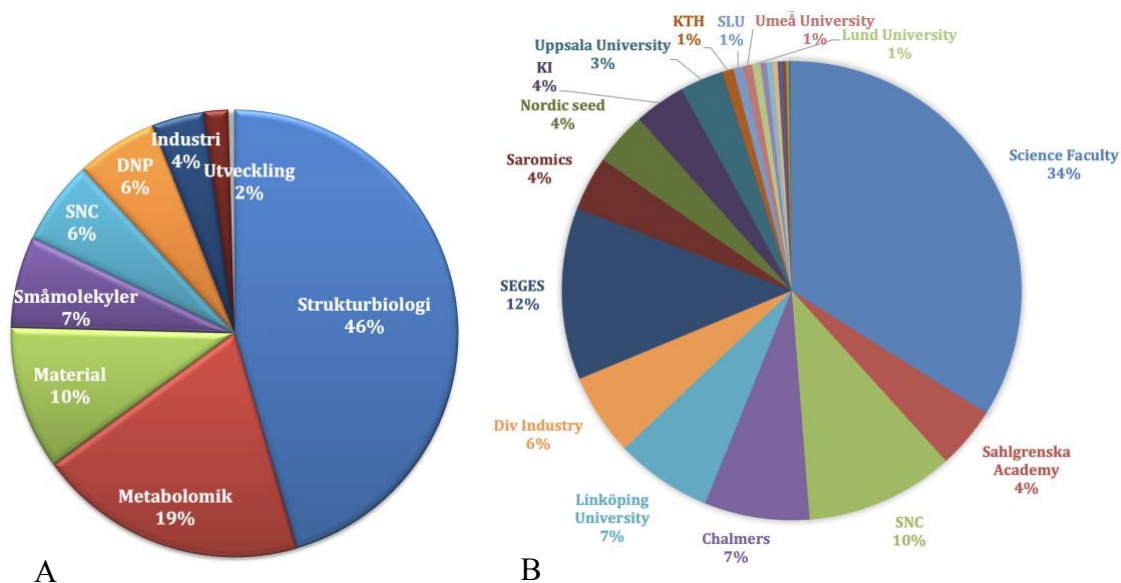
Figur 3. Två nya kvävetankar

Användare per applikationsområden

Användningstid fördelat på applikationsområde åskådliggörs i figur 5 A. Tillämpningar inom strukturbologi står för knappt hälften av den totalt spektrometertiden. Metabolomik står för ca 20%, medan Materialvetenskap (10%) resp småmolekyler (7%) står för en mindre del av spektrometertiden. Användningstid för DNP-NMR och industri redovisas separat, liksom intern användning vid Svenskt NMR-centrum.

Användare från Göteborgs universitet står för knappt hälften av utnyttjad spektrometertid. Nästan alla större svenska universitet återfinns bland användarna liksom Västra Götalandsregionen och universiteten i Århus, Roskilde Valencia och Dublin (Figur 5 B).

Under året har 59 forskare (PIs) fått access eller support från Svenskt NMR-centrum. Av dessa utgjorde 18 st (31%) kvinnor. Användningen fördelas på 119 projekt av varierande omfattning. Strukturbologi dominerar med 41 projekt, följt av småmolekyler (26), metabolomik (19), materialvetenskap (12), industri (11), DNP-NMR (8) och undervisning (2). Av de 119 projekten hade 38% kvinnliga projektledare.



Figur 5. (A) Spektrometertid i procent av totalt använd tid fördelat per applikationsområde. (B) Procentuell fördelning per universitet. Användning under 0.5% visas inte i bilden.

Personella resurser och infrastruktur

Föreståndaren (60%) ansvarar för övergripande ledning av och har arbetsmiljöansvar för personalen vid Svenskt NMR-centrum, åtta 1:e forskningsingenjörer och en senior forskare (20%). Av de åtta 1:e forskningsingenjörerna har motsvarande 5.5 FTE (heltidsekvivalent) varit direkt aktiva inom NMR-relaterad verksamhet. Därutöver har 0.25 FTE haft en koordinerad roll inom SciLifeLab (ISB-plattformen) 0.25 FTE varit knuten till NBIS (nationell forskningsinfrastruktur för bioinformatik), 0.7 FTE verksam inom CBCS (nationell forskningsinfrastruktur för kemisk biologi), och 0.8 FTE inom PPS (nationell forskningsinfrastruktur för proteinproduktion). Personella resurser inom NMR-verksamhet har fördelats med ca 1.6 FTE inom metabolomik, 1 FTE för DNP-NMR, ca 1.5 FTE för småmolekyler/materialvetenskap och ca 1.4 FTE inom strukturbiologi/kemisk biologi. Drygt 1/3 av den nominella arbetstiden åtgår för underhåll, metod- och kompetensutveckling, samt administration (bl a arbetsmiljö, säkerhet, miljö, likabehandling, GDPR, IT). Internt utvecklingsarbete har bl a fokuserat på orsak och metodik för undertryckning av t_1 -brus, nya experimentella metoder för fokuserad sekventiell tillordning samt användning av NMR för kvalitativ analys av små och stora biomolekyler.

Publikationer

Under 2022 finns 27 publikationer som antingen har medförfattare från NMR-centrum (12 publikationer) eller där NMR-centrum får erkännande i egenskap av forskningsinfrastruktur (15 publikationer), (se bilaga 1).

Outreach och övriga aktiviteter

De pandemi-relaterade restriktionerna upphörde under 2022, men fysiska möten har ändå minskat i omfattning i förhållande till läget innan pandemin. Interaktion och drop-in diskussioner med lokala användare har skett kontinuerligt. Flertalet verksamheter vid NMR-centrum genomförs i samverkan med andra forskningsinfrastrukturer.

Kick-off inom SwedNMR samlade ca 30 deltagare 5-6 april till ett möte i Uppsala. En internationell workshop, "AI in NMR", 26-30 september, med flera internationella föreläsare samlade ca 20 doktorander och post-docs. Workshopen skedde på plats men deltagande på distans var också möjligt. Det nationella NMR-mötet, Swedish NMR meeting, arrangerades av Svenskt NMR-centrum i konferenscentrum Wallenberg, 6-8 oktober, och samlade ca 80 deltagare. Svenskt NMR-centrum deltog också i planering och genomförande av en nationell forskarutbildningskurs för integrerad strukturbiologi (SciLifeLab tillsammans med MaxIV och ESS) som arrangerades på plats i Lund, Göteborg och Stockholm, 22 augusti – 2 september. Det årliga mötet för användare inom ISB-plattformen (SciLifeLab) arrangerades den 12 december på SciLifeLab, Stockholm, och samlade att 60-tal deltagare. Två minisymposia med fokus på "Dissolution DNP" resp "Non-Uniform Sampling" arrangerades i december. Svenskt NMR-centrum presenterades på infrastruktursession vid SweProt-mötet i Tällberg, 17-20 juni, 2022, och en muntlig presentation "NMR and QC" gavs vid det nationella biobanksmötet i Göteborg, 8 september.

Svenskt NMR-centrum deltog också i undervisning på avancerad nivå vid GU, bl a i kurserna KEM360 (strukturbiologi) och KEM840 (NMR för apotekare).

Användarenkät

En enkät skickades ut till 203 PIs som varit användare vid Svenskt NMR-centrum (GU och Umeå) under 2021 och 2022. Enkäten inkluderar även användare inom SwedNMR 2022. Totalt 58 användare (svarsfrekvens 29 %) från 11 svenska universitet, internationella användare, industri och regioner svarade. Användarna var generellt mycket nöjda med interaktion med forskningsinfrastrukturen, service, kommunikation, teknologi och prismodell. Sammanställning av enkäten redovisas i bilaga 2.

Finansiering av forskningsinfrastrukturen:

Svenskt NMR-centrum har under 2022 koordinerat eller varit delaktig i flera nationella och internationella forskningsinfrastrukturer. Verksamheter och verksamhetsperiod för forskningsinfrastrukturer finansierade av vetenskapsrådet är:

- SwedNMR (2022-2026), som också koordineras av Svenskt NMR-centrum,
- CBCS (2022-2026)
- PPS (2022-2026)
- NBIS (2020-2024)

Svenskt NMR-centrum är en enhet inom SciLifeLab (2021-2024) och föreståndaren koordinerar Integrated Structural Biology-plattformen inom SciLifeLab.

På EU-nivå deltar Svenskt NMR-centrum i forskningsinfrastrukturerna PANACEA (2021-2025) och R-NMR (2022-2025).

Lokalt får Svenskt NMR-centrum medel från både naturvetenskapliga fakulteten och Sahlgrenska akademien. Rektor bidrar med strategisk medfinansiering och samfinansiering till Svenskt NMR-centrum i dess egenskap av GU-forskningsinfrastruktur. Den strategiska medfinansieringen är beroende av extern finansiering från tex vetenskapsrådet, eller SciLifeLab. Modellen för strategiska samfinansiering utreds för närvarande och skall modifieras, preliminärt med start 2025.

Ekonomi - resultat för 2022

Resultaträkning för Svenskt NMR-centrum under 2022 redovisas i tabell 1. Resultat följer budget någorlunda. På intäktssidan ökar *försäljning* med 1.5 MKr medan *periodisering av projekt* (-1369 kkr) skiljer sig avsevärt från budget (925 kkr). På utgiftssidan är *Lön och övr.personalkostnad* något under budget (0.6 MKr), huvudsakligen beroende på försenade rekryteringar. *Driftskostnad* är 1.2 MKr över budget (särskilt kostnader för helium och förbrukningsmtrl), men även *lokalkostnader* avviker kraftigt (+0.6 MKr). *Intern samfinansiering* (2112 kkr), som ökar både intäkter och utgifter, ger en artificiell budgetpåverkan. Resultatet (-171 kkr) är marginellt sämre än budget (0).

Resultaträkning	Budget	Utfall	%
Anslag	4 952	4 557	92
Försäljning	1 500	2 968	198
Interna bidrag	1 500	1 500	100
Bidrag	4 450	6 871	154
Samfinansiering	1905	4 590	241
Finansiella intäkter	10	21	210
Periodisering påg proj	925	-1369	-150
Täckn. avs BF anlägg.	18	18	109
Avs bidragsfin.anl.	500		
Intäkter	15 760	19 157	129%
Lönekostnader	7 402	6 930	94
Förändr. semesterskuld	0	-12	
Övr personalkost	250	131	52
Övrig Drift	3 871	5 101	132
Samfinansiering	0	2 112	
Indirekta kostnader		211	
Lokalkostnader	1 912	2 523	132
Finansiella kostnader	0	19	
Avskrivningar	2 125	2 314	109
Kostnader	15 760	19 328	123
Totalt	0	-177	

Publikationer 2022

Artiklar med tack till Svenskt NMR-centrum (1-15) och med medförfattare från Svenskt NMR-centrum (16-27).

1. Wieske LHE, Bogaerts J, Leding AAM, Wilcox S, Andersson Rasmussen A, Leszczak K, Turunen L, Herrebout WA, Hubert M, Bayer A, et al. NMR Backbone Assignment of VIM-2 and Identification of the Active Enantiomer of a Potential Inhibitor. *ACS Medicinal Chemistry Letters* 2022, [doi:10.1021/acsmchemlett.1c00635](https://doi.org/10.1021/acsmchemlett.1c00635).
2. Wieske LHE, Atilaw Y, Poongavanam V, Erdélyi M, Kihlberg J. Going Viral: An Investigation into the Chameleonic Behavior of Antiviral Compounds. *Chemistry – A European Journal* 2022, [doi:10.1002/chem.202202798](https://doi.org/10.1002/chem.202202798).
3. Schäfer C, Mony J, Olsson T, Börjesson K. Effect of the Aza-N-Bridge and Push–Pull Moieties: A Comparative Study between BODIPYs and Aza-BODIPYs. *The Journal of Organic Chemistry* 2022, [doi:10.1021/acs.joc.1c02525](https://doi.org/10.1021/acs.joc.1c02525).
4. Rush JS, Parajuli P, Ruda A, Li J, Pohane AA, Zamakhaeva S, Rahman MM, Chang JC, Gogos A, Kenner CW, et al. PplD is a de-N-acetylase of the cell wall linkage unit of streptococcal rhamnopolysaccharides. *Nature Communications* 2022, 13:590, [doi:10.1038/s41467-022-28257-0](https://doi.org/10.1038/s41467-022-28257-0).
5. Palica K, Voráčová M, Skagseth S, Andersson Rasmussen A, Allander L, Hubert M, Sandegren L, Schröder Leiros H-K, Andersson H, Erdélyi M. Metallo- β -Lactamase Inhibitor Phosphoramidate Monoesters. *ACS Omega* 2022, [doi:10.1021/acsomega.1c06527](https://doi.org/10.1021/acsomega.1c06527).
6. Palasingh C, Nakayama K, Abik F, Mikkonen KS, Evenäs L, Ström A, Nypelö T. Modification of xylan via an oxidation–reduction reaction. *Carbohydrate Polymers* 2022:119660, [doi:10.1016/j.carbpol.2022.119660](https://doi.org/10.1016/j.carbpol.2022.119660).
7. Nowacka-Perrin A, Steglich T, Topgaard D, Bernin D. In situ ^{13}C solid-state polarization transfer NMR to follow starch transformations in food. *Magnetic Resonance in Chemistry* 2022, [doi:10.1002/mrc.5253](https://doi.org/10.1002/mrc.5253).
8. Naserifar S, Kuijpers PF, Wojno S, Kadar R, Bernin D, Hasani M. In situ monitoring of cellulose etherification in solution: probing the impact of solvent composition on the synthesis of 3-allyloxy-2-hydroxypropyl-cellulose in aqueous hydroxide systems. *Polymer Chemistry* 2022, [doi:10.1039/d2py00231k](https://doi.org/10.1039/d2py00231k).
9. Morais EM, Abdurrokhman I, Martinelli A. Solvent-Free Synthesis of Protic Ionic Liquids. Synthesis, Characterization and Computational Studies of Triazolium based Ionic liquids. *Journal of Molecular Liquids* 2022:119358, [doi:10.1016/j.molliq.2022.119358](https://doi.org/10.1016/j.molliq.2022.119358).
10. Lindroth R, Ondrejková A, Wallentin C-J. Visible-Light Mediated Oxidative Fragmentation of Ethers and Acetals by Means of Fe(III) Catalysis. *Organic Letters* 2022, [doi:10.1021/acs.orglett.2c00231](https://doi.org/10.1021/acs.orglett.2c00231).
11. Kozłowski AM, Hasani M. Cellulose interactions with CO₂ in NaOH(aq): The (un)expected coagulation creates potential in cellulose technology. *Carbohydrate Polymers* 2022, 294:119771, [doi:10.1016/j.carbpol.2022.119771](https://doi.org/10.1016/j.carbpol.2022.119771).

12. Klinke N, Meyer H, Ratnavadivel S, Reinhardt M, Heinisch JJ, Malmendal A, Milting H, Paululat A. A *Drosophila melanogaster* model for TMEM43-related arrhythmogenic right ventricular cardiomyopathy type 5. *Cellular and Molecular Life Sciences* 2022, 79:444, [doi:10.1007/s00018-022-04458-0](https://doi.org/10.1007/s00018-022-04458-0).
13. Kaldmäe M, Vosselman T, Zhong X, Lama D, Chen G, Saluri M, Kronqvist N, Siau JW, Ng AS, Ghadessy FJ, et al. A “spindle and thread” mechanism unblocks p53 translation by modulating N-terminal disorder. *Structure* 2022, [doi:10.1016/j.str.2022.02.013](https://doi.org/10.1016/j.str.2022.02.013)
14. Hulander E, Lindqvist HM, Wadell AT, Gjertsson I, Winkvist A, Bärebring L. Improvements in Body Composition after a Proposed Anti-Inflammatory Diet Are Modified by Employment Status in Weight-Stable Patients with Rheumatoid Arthritis, a Randomized Controlled Crossover Trial. *Nutrients* 2022, 14, [doi:10.3390/nu14051058](https://doi.org/10.3390/nu14051058).
15. Haque M, Abdurrokhman I, Idström A, Li Q, Rajaras A, Martinelli A, Evenäs L, Lundgren P, Enoksson P. Exploiting low-grade waste heat to produce electricity through supercapacitor containing carbon electrodes and ionic liquid electrolytes. *Electrochimica Acta* 2022, 403:139640, [doi:10.1016/j.electacta.2021.139640](https://doi.org/10.1016/j.electacta.2021.139640)
16. Wang Z, Guo D, Tu Z, Huang Y, Zhou Y, Wang J, Feng L, Lin D, You Y, Agback T, et al. A Sparse Model-Inspired Deep Thresholding Network for Exponential Signal Reconstruction--Application in Fast Biological Spectroscopy. *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems* 2022:1-15, [doi:10.1109/TNNLS.2022.3144580](https://doi.org/10.1109/TNNLS.2022.3144580).
17. Stern Q, Cousin Samuel F, Mentink-Vigier F, Pinon Arthur C, Elliott Stuart J, Cala O, Jannin S. Direct observation of hyperpolarization breaking through the spin diffusion barrier. *Science Advances* 2022, 7:eabf5735, [doi:10.1126/sciadv.abf5735](https://doi.org/10.1126/sciadv.abf5735).
18. Nilsson AK, Tebani A, Malmodin D, Pedersen A, Hellgren G, Löfqvist C, Hansen-Pupp I, Uhlén M, Hellström A. Longitudinal Serum Metabolomics in Extremely Premature Infants: Relationships With Gestational Age, Nutrition, and Morbidities. *Frontiers in Neuroscience* 2022, 16, [doi:10.3389/fnins.2022.830884](https://doi.org/10.3389/fnins.2022.830884).
19. Martin WP, Malmodin D, Pedersen A, Wallace M, Fändriks L, Aboud CM, Petry TBZ, Cunha da Silveira LP, da Costa Silva ACC, Cohen RV, et al. Urinary Metabolomic Changes Accompanying Albuminuria Remission following Gastric Bypass Surgery for Type 2 Diabetic Kidney Disease. *Metabolites* 2022, 12, [doi:10.3390/metabo12020139](https://doi.org/10.3390/metabo12020139).
20. Martin WP, Nair M, Chuah YHD, Malmodin D, Pedersen A, Abrahamsson S, Hutter M, Abdelaal M, Elliott JA, Fearon N, et al. Dietary Restriction and Medical Therapy Drives PPAR α -Regulated Improvements in Early Diabetic Kidney Disease in Male Rats. *Clinical Science* 2022:CS20220205, [doi:10.1042/CS20220205](https://doi.org/10.1042/CS20220205).
21. Martin WP, Chuah YHD, Abdelaal M, Pedersen A, Malmodin D, Abrahamsson S, Hutter M, Godson C, Brennan EP, Fändriks L, le Roux CW, Docherty NG. Medications Activating Tubular Fatty Acid Oxidation Enhance the Protective Effects of Roux-en-Y Gastric Bypass Surgery in a Rat Model of Early Diabetic Kidney Disease. *Frontiers in Endocrinology* 2022, 12, [doi:10.3389/fendo.2021.757228](https://doi.org/10.3389/fendo.2021.757228)

22. Karlsson T, Winkvist A, Rådjursöga M, Ellegård L, Pedersen A, Lindqvist HM. Identification of Single and Combined Serum Metabolites Associated with Food Intake. *Metabolites* 2022, [doi:10.3390/metabo12100908](https://doi.org/10.3390/metabo12100908).
23. Han X, Levkovets M, Lesovoy D, Sun R, Wallerstein J, Sandalova T, Agback T, Achour A, Agback P, Orekhov VY. Assignment of IVL-Methyl side chain of the ligand-free monomeric human MALT1 paracaspase-IgL3 domain in solution. *Biomolecular NMR Assignments* 2022, [doi:10.1007/s12104-022-10105-3](https://doi.org/10.1007/s12104-022-10105-3).
24. Guo Y, Zhan J, Tu Z, Zhou Y, Wu J, Hong Q, Huang Y, Orekhov V, Qu X, Guo D. Hypercomplex Low Rank Reconstruction for NMR Spectroscopy. *Signal Processing* 2022:108809, [doi:10.1016/j.sigpro.2022.108809](https://doi.org/10.1016/j.sigpro.2022.108809).
25. Ghafouri B, Thordeman K, Hadjikani R, Bay Nord A, Gerdle B, Bäckryd E. An investigation of metabolome in blood in patients with chronic peripheral, posttraumatic/postsurgical neuropathic pain. *Scientific Reports* 2022, 12:21714, [doi:10.1038/s41598-022-26405-6](https://doi.org/10.1038/s41598-022-26405-6).
26. Chaves-Arquero B, Persson C, Merino N, Tomás-Cortazar J, Rojas AL, Anguita J, Blanco FJ. Structural Analysis of the Black-Legged Tick Saliva Protein Salp15. *International Journal of Molecular Sciences* 2022, 23, [doi:10.3390/ijms23063134](https://doi.org/10.3390/ijms23063134).
27. Agback P, Lesovoy DM, Han X, Sun R, Sandalova T, Agback T, Achour A, Orekhov VY. ^1H , ^{13}C and ^{15}N resonance assignment of backbone and IVL-methyl side chain of the S135A mutant NS3pro/NS2B protein of Dengue II virus reveals unique secondary structure features in solution. *Biomolecular NMR Assignments* 2022, [doi:10.1007/s12104-022-10071-w](https://doi.org/10.1007/s12104-022-10071-w).

Summary of user survey 2022

This survey was sent out to all users that had submitted a project application through the SwedNMR web portal during 2022 or that already had an active project at the Swedish NMR Centre (SNC) during 2021-2022. The recipients of the survey thus comprise of both SNC and SwedNMR users and no distinction was made between the two user groups as feed-back from SNC users also are of major importance to further develop SwedNMR.

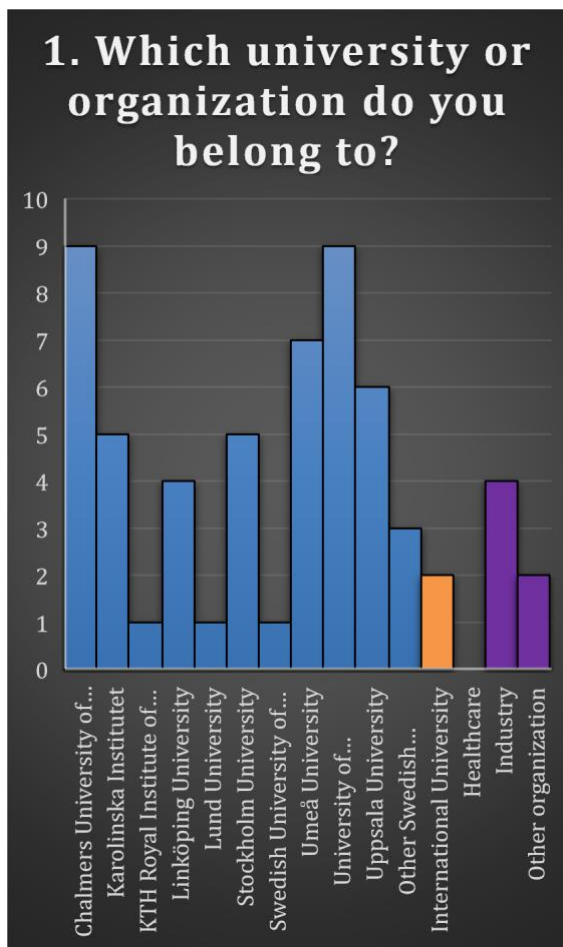
The survey was sent out to 203 users and 58 answered (29%).

In summary, the responders are mainly academic users, affiliated with eleven different Swedish universities with a few users from international universities, industry or other organizations. A vast majority of the responding users are very happy with the interactions they have had with SwedNMR/SNC, both in terms of service and communication but also with the technology we offer and the price model. We have many returning users and all responders would consider using our services for future research projects. Two users commented on a lack of communication from SwedNMR/SNC and we also got a comment about the need for an even higher field instrument.

The survey consisted of 10 questions and a more comprehensive overview of the survey follows below.

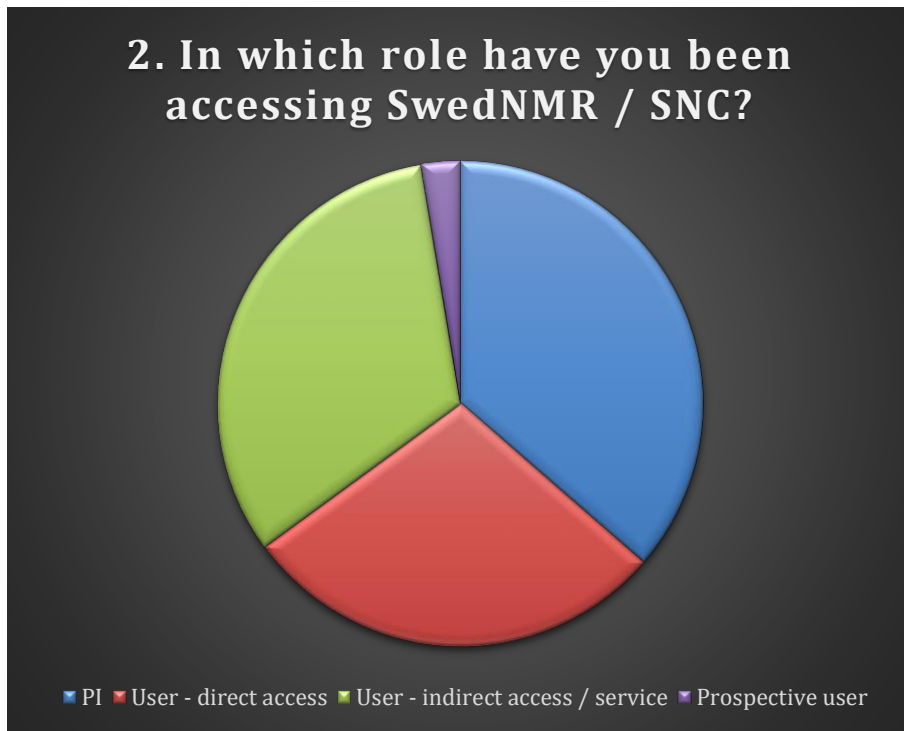
1. Q: Which university or organization do you belong to?

Summary: A vast majority of the users represent Swedish Universities (51 users, 88%) and at least 11 different universities are represented. The other 22% (7 users) represent either international universities (green), or industry or other organizations (purple).



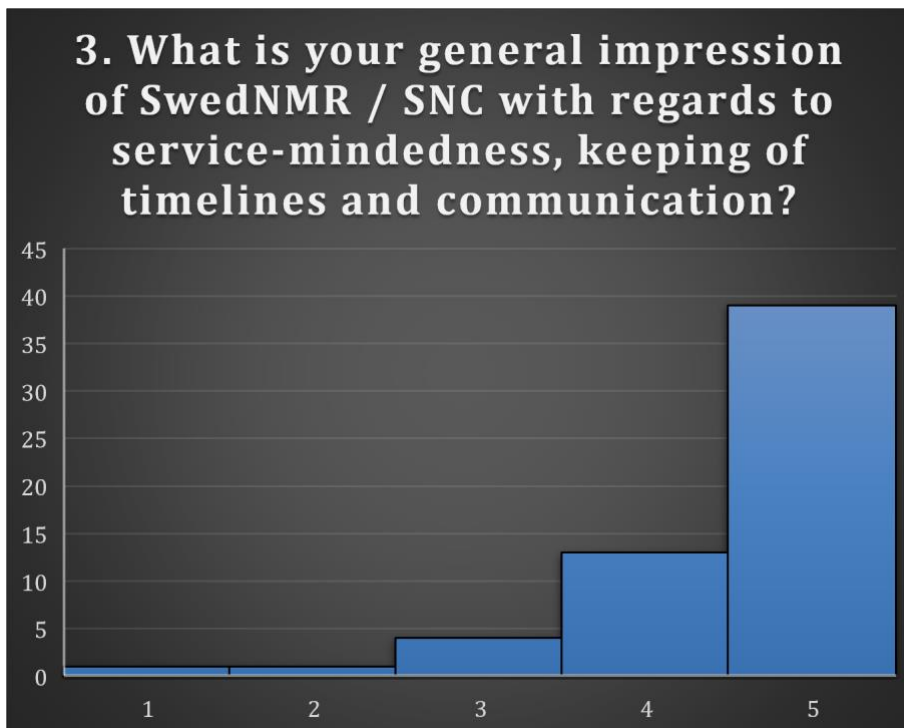
2. **Q: In which role have you been accessing SwedNMR/SNC, choose as many as you like?**

Summary: There were 77 total entries, because many users reported both PI and user level. There is an almost equal distribution of users with direct access (meaning that they run the spectrometers themselves) and indirect access (samples analyzed by SwedNMR/SNC personnel). Only two users reported being prospective users, not surprisingly a low numbers considering that a vast majority of survey recipients already had an active project running.



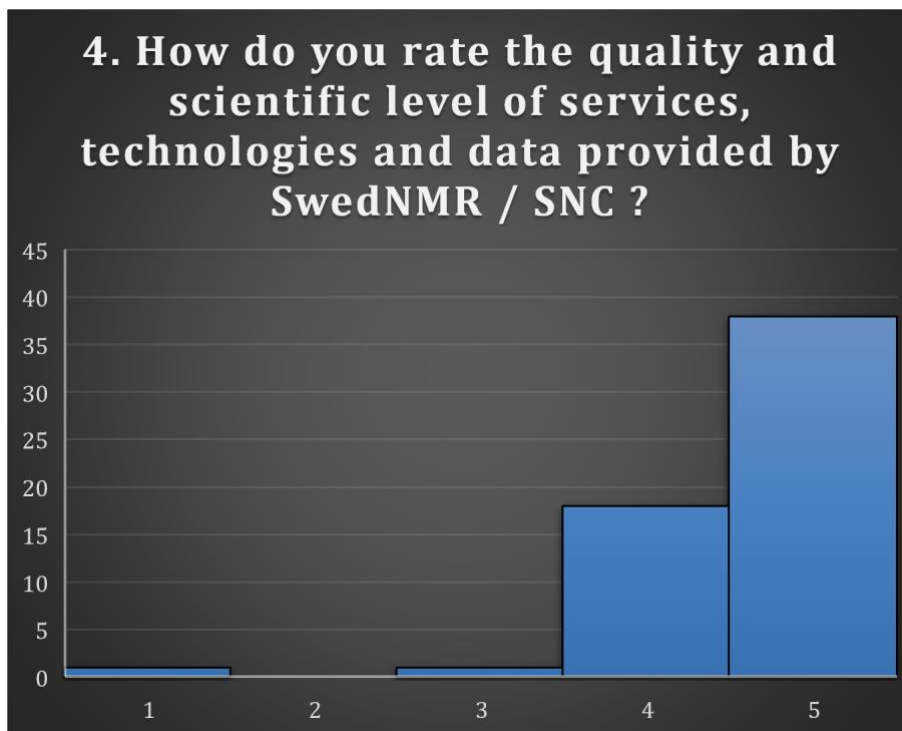
3. **Q: What is your general impression of SwedNMR/SNC with regards to service-mindedness, keeping of timelines and communication? (Scale 1-5).**

Summary: The average rating was 4.52 with the distribution shown below. To clarify, there was one user giving a rating of 1 and one user giving a rating of 2.



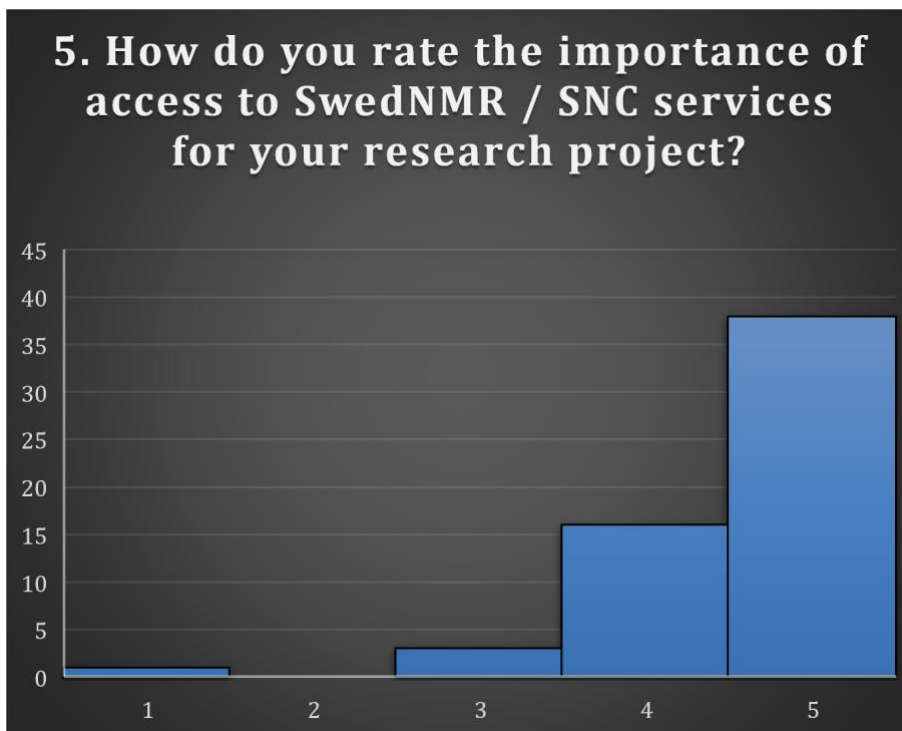
4. **Q: How do you rate the quality and scientific level of services, technologies and data provided by SwedNMR/SNC?**

Summary: The average rating was 4.59 with the distribution shown below. To clarify, one user gave rating 1 and one user gave rating 3.



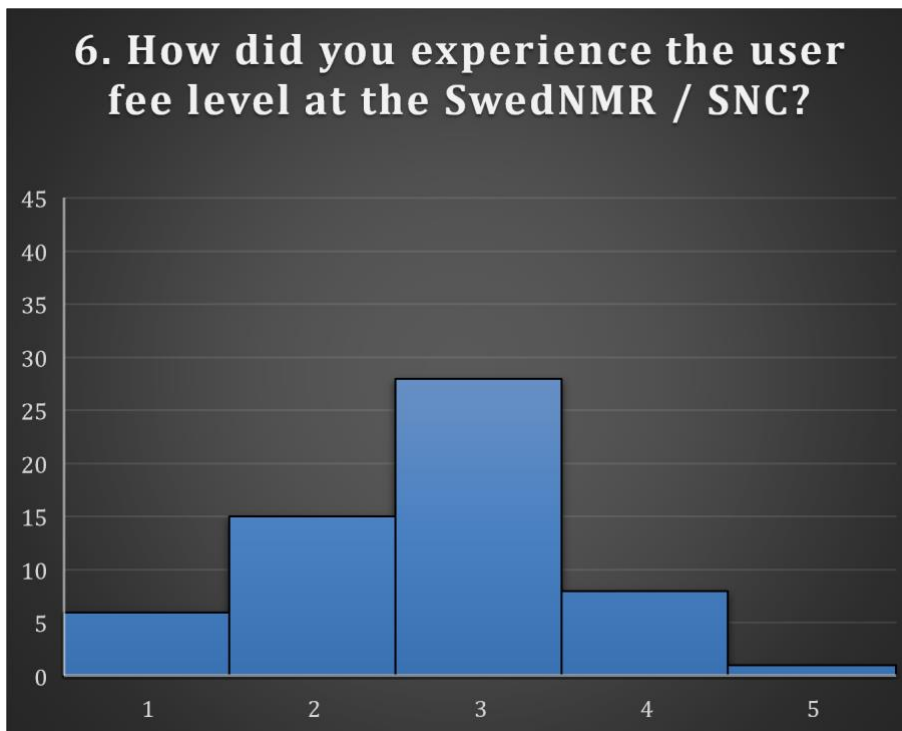
5. **Q: How do you rate the importance of access to SwedNMR/SNC services for your research project?**

Summary: Average rating was 4.55 with the distribution shown below. To clarify, only one user gave rating 1.



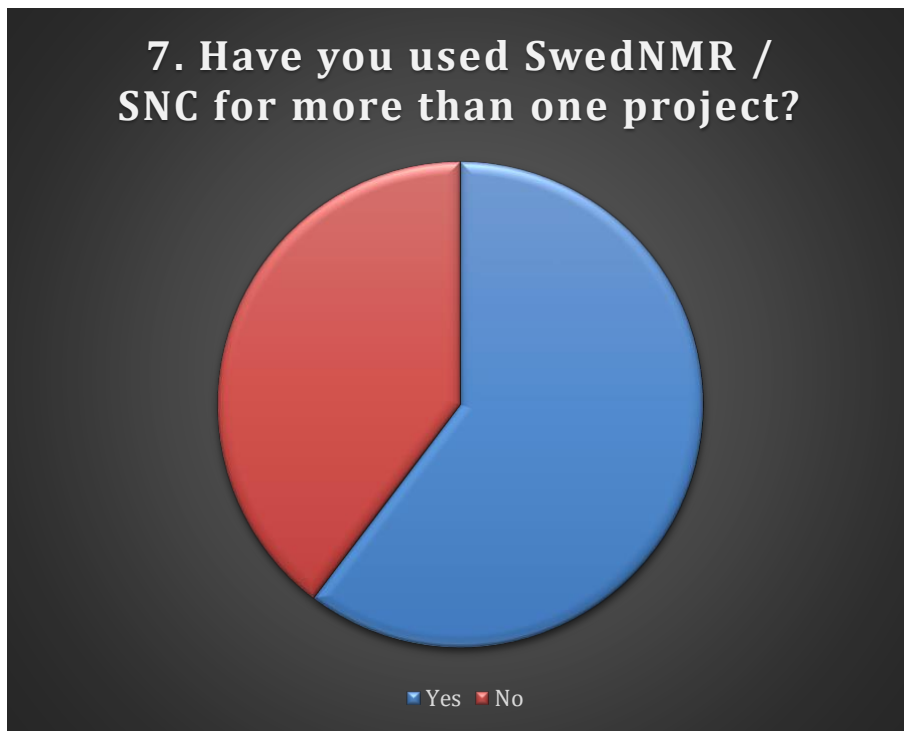
- 6. How did you experience the user fee level at the SwedNMR/SNC? Very cheap – 1, too expensive – 5.**

Summary: The average response was 2.71 meaning that most users find the user fees affordable.



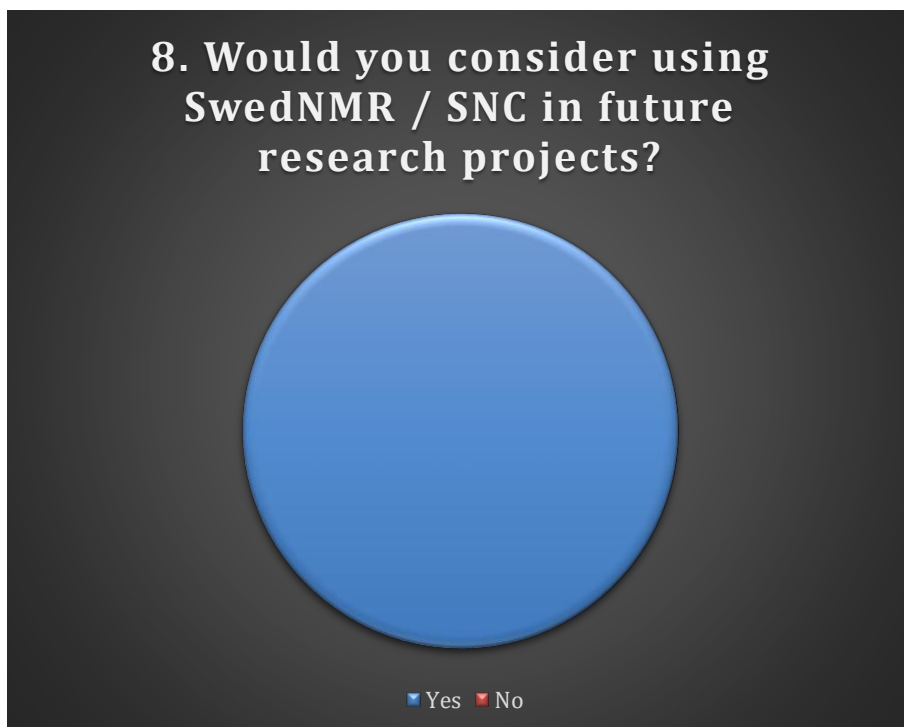
7. Q: Have you used SwedNMR/SNC for more than one project?

Summary: 35 out of 58 (60%) answered yes on this question.



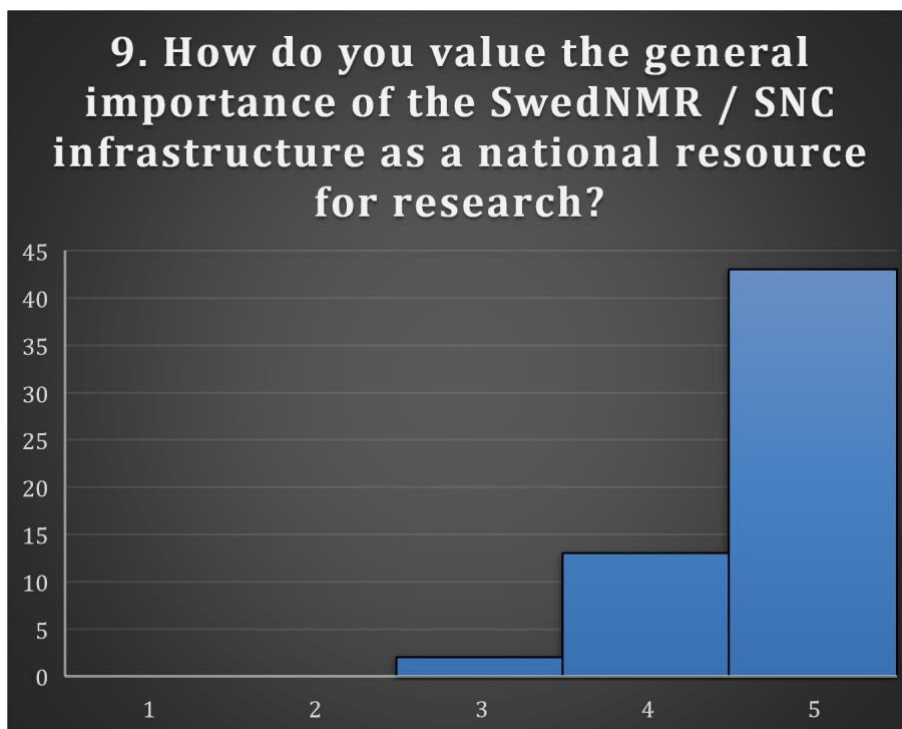
8. Q: Would you consider using SwedNR/SNC in future research projects?

Summary: All users answered yes.



9. How do you value the general importance of the SwedNMR/SNC infrastructure as a national resource for research? (1-5)

Summary: The average rating was 4.71 with no user giving a rating below 3, see distribution below.



10. Q: If there are any general comments or suggestions on services/technologies that you think are missing at SwedNMR/SNC, please provide them in the text field below.

Summary: Seven users left a comment in this field and although most comments were very positive, there were also a couple of users that had experienced lack of communication in their contacts with SwedNMR/SNC or requested higher-field instruments (900MHz – 1.2GHz).